揺動散逸定理について (確率過程論と開放系の統計力学)

岡部, 靖憲

数理解析研究所講究録
367巻 1979年 94-113

揺動散逸定理について

東大　理　岡部靖憲

§1 序

Einstein (1905), Nyquist (1928), Kubo (1957, 1965, 1966), Mori (1965) 等の研究において示された揺動散逸定理は、熱運動を行なっている微視的な力学量と相互作用している物理系は、その系のうける微視的な力の、"systematic" な部分と、"random" な部分の間の内部関係を与える定理であり、その系が線型のとき、"systematic" な部分は系函数によって、"random" な部分はそのスペクトル密度によって、特徴づけられるので、系函数とスペクトル密度との関係を与えるのが、揺動散逸定理ともいえる。

この報告で得られることは、揺動散逸定理は、数学的には、スペクトルの逆問題であり、しかもそれは、Sturm-Liouville 型の inverse problem とは別の次元---ランダムな世界---の、Langevin 型の inverse problem といえるということである。しかし、両者の逆問題は、弦の振動方程式とランジュヴァン方程式の解の時

間発展を与える作用素は、互いにユリクリー同値になる、という意味で結びついている。

§2 Ornstein-Uhlenbeckのブラウン運動

スペクトル密度$\Delta(\xi)$が、$\dfrac{v}{\pi}\dfrac{\beta}{\xi^2+\beta^2}$ $(v>0, \beta>0)$、従って、共分散函数$R(t)$が、$v\cdot e^{-\beta|t|}$、となる正規定常過程$\mathbb{X}=(X(t), t\in\mathbb{R})$が、Ornstein-Uhlenbeckのブラウン運動である。これは、正規定常過程の中で、単純マルコフ性をもつものとして特徴づけられる。そのことの反映として、$\mathbb{X}$を支配するランジュヴァン方程式

$$(2.1)\qquad X(t)-X(s) = -\int_s^t \beta X(u)\,du + \sigma\cdot(B(t)-B(s)) \quad (s<t)$$
$$(\beta>0,\ \sigma>0)$$

が導かれる。ここで、σ, β, v, Rの間には、

$$(2.2)\qquad \sigma^2 = 2\beta v,\quad R(0)=v$$

なる関係がある。これが、Einsteinの関係式である。

方程式(2.1)の右辺の第一項は、物理系の"systematic"な部分であり、花粉の粒子が液体中を浮遊するときにうける抵抗にあたり、βが抵抗係数である。このとき、共分散函数Rが$R(t) = ve^{-\beta|t|}$ $(t\in\mathbb{R})$より、

$$(2.3)\qquad \frac{1}{\beta-i\xi} = \frac{1}{R(0)}\int_0^\infty e^{i\xi t}R(t)\,dt \qquad (\xi\in\mathbb{R})$$

が成り立つ。これは、速度(花粉粒子の)の複素移動度(mobility)

を、速度の共分散函数のFourier-Laplace変換として与えるもので、第1種揺動散逸定理とよばれる。数学的に意味をつけるとすれば、(2.3)の右辺は、正規定常過程$\mathfrak{X}$に対し、その共分散函数Rを正規化($\frac{R(t)}{R(0)}$)したもののFourier-Laplace変換として、Rだけから定まり、(2.3)の左辺は、$\mathfrak{X}$を支配する方程式(2.1)を導いてはじめて移動度としての意味がつくものである。この考えを徹底させると、共分散函数Rは、スペクトル密度ΔのFourier変換として定まり、Δは、outer functionとよばれるhで定まる。hは、

(2.4) $$|h(\xi)|^2 = \Delta(\xi) \quad (\xi \in \mathbb{R})$$

(2.5) $$h \in \mathcal{O}(\mathbb{C}^+),\quad h(\zeta) \neq 0 \quad \forall \zeta \in \mathbb{C}^+ = \{\zeta \in \mathbb{C};\ \mathrm{Im}\,\zeta > 0\},$$

$$\sup_{\eta > 0} \int_{\mathbb{R}} |h(\xi + i\eta)|^2 d\xi < \infty$$

(2.6) $$h(\xi) = h(\xi + i0),\quad \overline{h(\xi)} = h(-\xi)$$

として唯ひとつに定まる。

今の場合、$\Delta(\xi) = \frac{v}{\pi}\frac{\beta}{\xi^2+\beta^2}$ であるから、

(2.7) $$h(\xi) = \sqrt{\frac{v\beta}{\pi}}\,\frac{1}{\beta - i\xi}$$

となる。そのとき、Einsteinの関係式(2.2)を用いると、

(2.8) $$\frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\beta - i\xi} = h(\xi) \quad (\xi \in \mathbb{R})$$

が成り立つ。この(2.8)の右辺は、$\mathfrak{X}$のスペクトル密度のouter functionであり、(2.8)の左辺は、ランジュヴァン方程式(2.1)を導いてその意味が、white noise $\dot{B}(t)$を入力電源としたときの伝達函数としての回路網としての意味が、数学的には、シュボルとしての意味：

$$(2.9)\qquad X(t) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sigma}{\beta - i\xi} \hat{\dot{B}} \right)^{\sim}$$

がつくのである。そして、(2.8)において、$\xi = 0$を代入すると、(2.7)に注意して、$\sigma = \sqrt{2\beta v}$、即ち、Einsteinの関係式(2.2)が導けるので、(2.8)をもって、Einsteinの関係式をその静的なものとして導くので($\xi=0$を入れると)、新しい意味の、揺動散逸定理が成り立つということができる。

一方、§1でのべた"systematic"な部分と"random"な部分の間の内部関係を与えるものとして、第2種揺動散逸定理がすでにあり、それは、(2.2)の"random"な部分から導かれる力$(\sigma \cdot \dot{B}(t); t \in \mathbb{R})$の共分散函数を$R_r$とするとき、

$R_r(t) = \sigma^2 \delta(t)$であるから、

$$(2.10)\qquad \beta = \frac{1}{2R(0)} \int_0^{\infty} e^{i\xi t} R_r(t)\,dt \qquad (\xi \in \mathbb{R})$$

が、(2.2)より成り立つ。これは、抵抗係数をランダムな力の共分散函数のFourier-Laplace変換として与えるもので、これが、第2種揺動散逸定理である。これの静的なものとして(実際はξとには定数だが)、Einsteinの関係式(2.2)が導ける。

我々がのべた揺動散逸定理(2.8)は、静的なものとして Einsteinの関係式(2.2)を導くので、この意味では、第2種揺動散逸定理と同じ役割をはたしている。

さて、いままでの議論は、単純マルコフ性をもつ系に対してであったが、マルコフ性をもたない系に対しても、我々の意味の揺動散逸定理が成り立つのであろうか？ そのことを以下において述べることにする。

§3 T－正値性

$\mathbb{X}=(X(t);\ t\in\mathbb{R})$ を正規定常過程とする。構成的な場の理論で大切な Osterwalder-Schrader property とよばれる、次のT－正値性(time-reflection property)を考えよう.

$$T:\quad X(t)\longrightarrow X(-t)\qquad (t\in\mathbb{R})$$

このTを、$X(t)\ (t\in\mathbb{R})$のすべての張る閉部分空間$\mathcal{M}$上の、自己共役な作用素と考えるとき、$\mathcal{M}$から、$X(t)\ (t>0)$の張る閉部分空間$\mathcal{M}^+$への射影をP_+とするとき、$\mathbb{X}$がT－正値性をもつとは、

$$(3.1)\qquad P_+TP_+\geq 0$$

が成り立つこととする。このことは、$\mathbb{X}$の共分散函数をRとするとき、

$$(3.2)\qquad R(t-s)=\langle X(t),X(s)\rangle\quad (t,s\in\mathbb{R})、$$

$$\forall n \in \mathbb{N},\quad \forall t_j \in [0,\infty),\ \forall \xi_j \in \mathbb{C} \quad (1 \leq j \leq n)$$

$$(3.3) \qquad \sum_{j,k=1}^{n} \xi_j R(t_j + t_k) \overline{\xi_k} \geq 0$$

と同値であることは すぐわかる。

さらに、 Bernsteinの定理を用いたWidderの結果より、このことは、 $\exists_1\, d\mu(\lambda)$: bounded measure on $[0,\infty)$ $\ni$

$$(3.4) \qquad R(t) = \int_0^\infty e^{-|t|\lambda} d\mu(\lambda) \qquad (t \in \mathbb{R})$$

なる表現式と同じことがわかる。

§2でのべた Ornstein-Uhlenbeckのブラウン運動は、その共分散函数は $v e^{-\beta|t|}$ $(t \in \mathbb{R})$ であったから、上の(3.4)において、 $d\mu(\lambda) = v\, \delta_{\{\beta\}}(d\lambda)$ として成り立ち、T一正値性をもつことがわかる。

この報告で対象とする系(X:正規定常過程)は、このT一正値性をもつものとして、§2で述べた意味の揺動散逸定理が成り立つかを以下において見ていくことにする。基本的な問題として、Xを支配する方程式を導くことである。T一正値性は、必ずしも単純マルコフ性をもたないので、(2.1)のような 拡散型の確率微分方程式は期待できない。それでは どのような方程式が 導かれるのであろうか?

(3.4)の 測度 $d\mu(\lambda)$ が 特殊な場合を考察して、発見的に導いていくことにする。

§4 多重マルコフ性

(3.4) において、 $d\mu(\lambda)$ が、

$$(4.1) \qquad d\mu(\lambda) = \sum_{n=1}^{d} \mu_n \delta_{\{p_n\}}(d\lambda) . \quad \left(\begin{array}{l} d \in \mathbb{N} \\ \mu_n > 0 \ (n=1,\cdots,d) \\ 0 < p_1 < p_2 < \cdots < p_d \end{array} \right)$$

の場合を考える。このときは、共分散函数 R は、(3.4) より、

$$(4.2) \qquad R(t) = \sum_{n=1}^{d} \mu_n e^{-|t| p_n}$$

従って、スペクトル密度 $\Delta(\xi)$ は、

$$(4.3) \qquad R(t) = \int_{\mathbb{R}} e^{-it\xi} \Delta(\xi) d\xi , \quad \Delta(\xi) = \sum_{n=1}^{d} \frac{\mu_n}{\pi} \frac{p_n}{\xi^2 + p_n^2}$$

となる。 $\Delta(\xi)$ が $2d$ 次の有理函数であることに注意して、 Δ の outer function h を、(2.4), (2.5), (2.6) をみたすものとして定めると、

$$(4.4) \qquad h(\xi) = \frac{Q(-\xi)}{P(-\xi)}$$

$$(4.5) \qquad P(\xi) = (p_1 + i\xi)(p_2 + i\xi) \cdots (p_d + i\xi) \qquad (d \text{次の多項式})$$

$$(4.6) \qquad Q(\xi) = c\,(q_1 + i\xi)(q_2 + i\xi) \cdots (q_{d-1} + i\xi) \qquad (d-1 \text{次の多項式})$$

と分解され、さらに、

$$(4.7) \qquad 0 < p_1 < q_1 < p_2 < \cdots < p_n < q_n < p_{n+1} < \cdots < p_d , \quad c > 0$$

と、 h の極と零点は、負の虚軸上に交互にあらわれている。

これは、確率過程 X は d-重マルコフ性をもっていることを意味する。一般に、 d-重マルコフ性をもつとは、 $\Delta(\xi)$ が $2d$ 次の有理函数ということであるが、この一般の場合、 Δ の outer function h は、(4.4) と同じく、

$$(4.8)\qquad h(\xi)=\frac{Q(-\xi)}{P(-\xi)}$$

と分かれるが、P, Q は、

$$(4.9)\quad \begin{cases} P(\xi)=\sum_{n=1}^{d} b_n(-i\xi)^n & b_n\in\mathbb{R},\ b_d\neq 0 \\ Q(\xi)=\sum_{n=1}^{d-1} \alpha_n(-i\xi)^n & \alpha_n\in\mathbb{R}\quad(\alpha_{d-1}=0\text{ かもしれない}) \\ V_P\subset\mathbb{C}^+,\ V_Q\subset\mathbb{C}^+\cup\mathbb{R},\ V_P\cap V_Q=\phi \end{cases}$$

をみたすだけである。ただし、V_S は多項式 S の零点の集合を示す。

このとき、Okabe (1974) より、d 次元の正規定常過程 $\mathfrak{X}(t)=(X_0(t), X_1(t), \cdots, X_{d-1}(t))^*$ が存在して、$\mathfrak{X}$ を支配する方程式は次の確率微分方程式となる：

$$(4.10)\quad \mathfrak{X}(t)-\mathfrak{X}(s)=\int_s^t A\mathfrak{X}(u)du+(\sqrt{2\pi})^{-1}\alpha\cdot(B(t)-B(s))\qquad(s<t).$$

ここで、α, A は、

$$(4.11)\qquad \alpha=\begin{pmatrix}\alpha_0\\ \alpha_1\\ \vdots\\ \alpha_{d-1}\end{pmatrix},\quad A=\begin{pmatrix}0 & & 0 & a_0\\ -1 & \ddots & & a_1\\ & \ddots & 0 & \vdots\\ 0 & & -1 & a_{d-1}\end{pmatrix},\quad a_n=\frac{b_n}{b_d}.$$

さらに、X と $\mathfrak{X}$ の関係は、

$$(4.12)\qquad X_{d-1}(t)=-\frac{b_d}{2\pi}X(t)\quad(t\in\mathbb{R})$$

であるから、(4.10) の d 成分をとると、

$$(4.11)\quad X(t)-X(s)=\int_s^t\left\{\frac{2\pi}{b_d}X_{d-2}(u)-a_{d-1}X(u)\right\}du+\sqrt{2\pi}\left(-\frac{\alpha_{d-1}}{b_d}\right)(B(t)-B(s))\quad(t<s)$$

が得られる。ところが、$X_{d-2}(u)$ は $M^-(u)\equiv X(v)\,(v\le u)$ すべての張る閉部分空間に入るので、(4.11) より、X は遅れのある確率

微分方程式

$$(4.12)\qquad X(t)-X(s)=\int_s^t \Phi(X(\cdot),\cdot\le u)\,du+\alpha'(B(t)-B(s))\quad(s<t)$$

を満足していることがわかる。ここで、Φは線型汎函数である。

注意　$X(t)$がtについて可微分のとき（$\alpha_{d-1}=0$）は、(4.12)は、

$$(4.13)\qquad X(t)-X(s)=\int_s^t X'(u)\,du$$

となり、物理系を"systematic"な部分と"random"な部分に分けることになっていないことを注意しておこう。

さて、一般の場合から我々のT-正値性をもつ場合に戻ると、(4.5),(4.6)より、$\alpha'=\sqrt{2\pi}\,c$となるから、(4.12)は、

$$(4.13)\qquad X(t)-X(s)=\int_s^t \Phi(X(\cdot),\cdot\le u)\,du+\sqrt{2\pi}\,c\,(B(t)-B(s))\quad(s<t)$$

となる。従って、問題は、この線型汎函数Φを求めることである。(4.4)〜(4.7)より、このΦは求まり、

$$(4.14)\qquad \Phi(X(\cdot),\cdot\le u)=-\beta X(u)+\int_{(-\infty,0)} X(u+s)\,\gamma(ds)\qquad(u\in\mathbb{R})$$

とかけ、β, γは、

$$(4.15)\qquad \beta=\sum_{n=1}^{d}p_n-\sum_{n=1}^{d-1}q_n>0,\quad \beta-\gamma((-\infty,0))>0$$

$$(4.16)\qquad \gamma(ds)=\sum_{n=1}^{d-1}\gamma_n e^{q_n s}\,ds,\quad \gamma_n=-\frac{\prod_{m=1}^{d}(p_m-q_n)}{\prod_{m\ne n}(p_m-p_n)}>0\quad(1\le n\le d-1)$$

で与えられる。従って、Xを支配する方程式は、次の遅れのあるランジュヴァン方程式であることがわかった。

$$(4.17)\qquad X(t)-X(s)=\int_s^t\{-\beta X(u)+\int_{(-\infty,0)}X(u+s)\gamma(ds)\}du+\sqrt{2\pi}c\,(B(t)-B(s))\qquad (s<t)$$

さらに、$\mathbf{X}$のスペクトル密度Δのouter function hは、

$$(4.18)\qquad h(\zeta)=c\cdot\frac{1}{\beta-\hat{\gamma}(\zeta)-i\zeta}\qquad (\zeta\in\mathbb{R}\cup\mathbb{C}^+)$$

であることがわかる。　この右辺は、ランジュヴァン方程式(4.17)のシンボル、伝達函数を表わしているので、§2で述べた如く、Ornstein-Uhlenbeckのブラウン運動に対して成り立った同じ型の揺動散逸定理が成り立っていることがわかる。では、一般の場合は、(4.17), (4.18)と同じ表現を得ることができるであろうか。そのためには、$[\alpha=\sqrt{2\pi}c,\ \beta,\ \gamma]$を(4.1)の測度$d\mu$でつかまえる必要がある。

§5　種々の公式

outer function h ($\in L^2$)のFourier変換をEとする:

$$(5.1)\qquad E(t)=\chi_{(0,\infty)}(t)\int_{\mathbb{R}}e^{-it\xi}h(\xi)d\xi\qquad (t\in\mathbb{R}).$$

今の場合、(4.4), (4.5), (4.6), (4.7)より

$$(5.2)\qquad E(t)=\chi_{(0,\infty)}(t)\int_{(0,\infty)}e^{-t\lambda}d\nu(\lambda),$$

$$(5.3)\qquad d\nu(\lambda)=\sum_{n=1}^{d}\nu_n\,\delta_{\{p_n\}}(d\lambda),\quad \nu_n=2\pi c\,\frac{\prod_{m=1}^{d-1}(p_n-q_m)}{\prod_{m\neq n}(p_n-p_m)}>0$$

と表現される。特に、

$$(5.4)\qquad E(0+)=2\pi c=\nu((0,\infty))$$

一方、(4.17)に $X(s)$ をかけ、 $X(s) \perp\!\!\!\perp B(t)-B(s)$ $(s<t)$ 注意して平均すると、

$$(5.4) \qquad R'(t) = -\beta R(t) + \int_{(-\infty,0)} R(t+s)\,\mathcal{H}(ds) \qquad (t>0)$$

さらに、(4.17)に Ito's formula を用いると、

$$(5.5) \qquad \alpha^2 = 2\beta R(0) - 2\int_{(-\infty,0)} R(s)\,\mathcal{H}(ds)$$

但し、 $\alpha = \sqrt{2\pi}\,C$

従って、(5.4), (5.5) より、

$$(5.6) \qquad \alpha^2 = -2R'(0+)$$

従って又 (4.1), (4.2) より、

$$(5.7) \qquad \alpha^2 = 2\int_{(0,\infty)} \lambda\, d\mu(\lambda)$$

これで、α は捕えられた。

次に β に移ろう。X と E との関係は、

$$(5.8) \qquad X(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{t} E(t-s)\,dB(s)$$

であることに注意して、(4.17)より、 E も又 (5.4)と同様に、

$$(5.9) \qquad E'(t) = -\beta E(t) + \int_{(-\infty,0)} E(t+s)\,\mathcal{H}(ds) \qquad (t>0)$$

を満たすことがわかる. しかし、 $E(t)=0$ $t<0$ であるから、

$$(5.10) \qquad E'(0+) = -\beta E(0+)$$

従って、(5.4) より、

$$(5.11) \qquad E'(0+) = -2\pi\beta C = -\sqrt{2\pi}\,\alpha\cdot\beta$$

一方、 R と E の関係は、

$$(5.12) \qquad R(t) = \frac{1}{2\pi} E * \check{E}(t) \qquad (t\in\mathbb{R})$$

であることと、(5-2)に注意して、次の公式を得る.

(5.13) $$-E(0+)E'(0+) = 2\pi R''(0+) + \int_0^\infty |E'(t)|^2 dt$$

ところが、一方、(4.1)のμ_nと(5-3)のν_nの間には、

(5.14) $$\mu_n = (2\pi)^{-1}\nu_n \sum_{m=1}^{\alpha} \frac{\nu_m}{p_n+p_m}$$

なる関係式が成りたつので、(4.2), (5-2), (5-3) より

(5-15) $$2\pi R''(0+) \geq \int_0^\infty |E'(t)|^2 dt$$

(4.1), (4.2) より

(5-16) $$R''(0+) = \int_{(0,\infty)} \lambda^2 d\mu(\lambda)$$

であるから、(5-11), (5-13), (5-15) より、βは(3.4)の測度$d\mu$の1次、2次のモーメントで捕えることができる. αは、(5-7)より、$d\mu$の1次のモーメントで捕えられていた

最後に、ランジュヴァン方程式(4.17)において、遅れの効果をもたらす測度$\gamma(ds)$であるが、これがなかなかむづかしい。ところが、我々は、揺動散逸定理(4.18)をもっているから、hが(3.4)の測度$d\mu$で捕えられればよい。まず、(3.4), (4.3) より、

(5.17) $$\Delta(\xi) = \int_{(0,\infty)} \frac{1}{\pi} \frac{\lambda}{\xi^2+\lambda^2} d\mu(\lambda) \qquad (\xi \in \mathbb{R})$$

§2において、Δの outer function h は、(2.4), (2.5), (2.6) によって定まるとのべたが、実は、上半平面$\mathbb{C}^+$においては、

(5-18) $$h(\zeta) = \exp\left\{\frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}} \frac{1+\lambda\zeta}{\lambda-\zeta} \frac{\log\Delta(\lambda)}{1+\lambda^2} d\lambda\right\} \qquad (\zeta \in \mathbb{C}^+)$$

かくして、hは、(5.17), (5.18)を通して、$d\mu$で捕えることができた。従って、前にのべた如く、摂動散逸定理(4.18)によって、$\mathcal{F}$が、従って測度$\delta(ds)$が捕えることができる。

§6 摂動散逸定理

さて、$\mathbb{X}$がT-正値性をもっている一般の場合を考えよう。$\mathbb{X}$のスペクトル密度Δがouter functionをもつのは、

$$(6.1) \qquad \frac{\log \Delta(\lambda)}{1+\lambda^2} \in L^1(\mathbb{R})$$

の場合であり、これは、T-正値性の枠組では、Okabe (1979)により、(3.4)の測度$d\mu$が原点にmassをもたないこと、即ち、

$$(6.2) \qquad d\mu(\{0\}) = 0$$

と同じことがわかっている。以下、この条件が成り立つとする。厳密にいうと、2段階の近似が必要であるが、大筋をのべると、(3.4)の測度$d\mu$を、discrete measure $d\mu_n$で近似する。

$$(6.3) \qquad d\mu_n \longrightarrow d\mu \quad \text{on } (0,\infty)$$

このとき、(5.17), (5.18)より、

$$(6.4) \qquad h_n(z) \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} h(z) \qquad \text{広義一様 on } \mathbb{C}^+$$

が成り立つ。このことは、基本的である。各近似列の段階において、摂動散逸定理(4.18)が成り立っている：

$$(6.5)\qquad h_n(z) = c_n \frac{1}{\beta_n - \hat{\gamma}_n(z) - iz} \qquad (z \in \mathbb{C}^+)$$

$$\left(c_n = \frac{\alpha_n}{\sqrt{2\pi}} \right)$$

§5で調べたように、c_n, β_n は $d\mu_n$ の1次、2次のモーメントで捕えられるので、$\{c_n, \beta_n ; n \in \mathbb{N}\}$ が相対コンパクトのためには、(3.4)の測度 $d\mu$ が、2次のモーメントをもつことが必要である。即ち、

$$(6.6)\qquad \int_{(0,\infty)} \lambda^2 d\mu(\lambda) < \infty$$

従って、以下の議論において、(6.2), (6.6) は本質的な条件となる。このとき、適当に部分列をとり直し、c_n, β_n, γ_n がそれぞれの意味で収束することがわかり、β_n γ_n の極限を互いにくり込み補正することによって、我々は次の定理を得る。

定理（揺動散逸定理）

正規定常過程 X は T-正値性をもち、その共分散函数を表現する (3.4)の測度 $d\mu$ は、条件 (6.2), (6.6) を満たすとする。このとき、X は、次の遅れのある確率微分方程式を満足する：

$$(6.7)\qquad X(t) - X(s) = \int_s^t \left\{ -\beta X(u) + \int_{(-\infty,0)} X(u+s)\gamma(ds) \right\} du + \alpha \cdot (B(t) - B(s)) \qquad (s < t)$$

ここで、$\alpha, \beta, \gamma, (B(t) ; t \in \mathbb{R})$ は、次の条件を満足する：

$$(6.8)\qquad \alpha > 0,\ \beta > 0$$

(6.9) $\gamma(ds)$ は $(-\infty,0)$ 上の有界な測度である.

(6.10) $\beta-\gamma((-\infty,0))>0$

(6.11) $(B(t); t\in\mathbb{R})$ は1次元ブラウン運動で、

$$\sigma(X(u); u\leq t) \perp\!\!\!\perp \sigma(B(s)-B(t); s>t) \quad (t\in\mathbb{R})$$

を満たす.

さらに、$\mathbb{X}$のスペクトル密度 Δ の outer function hは、

(6.12) $$h(\zeta)=\frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\beta-\hat{\gamma}(\zeta)-i\zeta} \quad (\zeta\in\mathbb{C}^{+}\cup\mathbb{R})$$

と分解される。 α,β,γ は唯ひとつに定まる。

注意 Kubo (1972) において、non-Markov の確率過程として、

(6.13) $$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}u(t) = -\displaystyle\int_{-\infty}^{t}\gamma(t-t')u(t')dt' + \frac{1}{m}R(t) \\ R(t)\text{は ランダム力} \end{cases}$$

を考え、 Rの共分散函数として、

(6.14) $$\langle R(t_1)\cdot R(t_2)\rangle = mkT\gamma(t_1-t_2)$$

を仮定している。 $R(t)$ がなめらかであり、その範囲での、§2でのべた Ornstein-Uhlenbeckのブラウン運動に対する Einsteinの関係式 (2.2) に相当する。 そのとき、第1種揺動散逸定理として、

(6.15) $$\frac{1}{m}\frac{1}{\hat{\gamma}(\omega)-i\omega} = \frac{1}{kT}\int_0^{\infty}e^{i\omega t}\langle u(t_0)u(t_0+t)\rangle dt$$

が、第2種揺動散逸定理として、

$$(6.16)\qquad m\hat{J}(\omega)=\frac{1}{kT}\int_0^\infty e^{i\omega t}\langle R(t_0)R(t_0+t)\rangle dt$$

が示されている。

これらは、Ornstein-Uhlenbeckのブラウン運動のときの第1種揺動散逸定理(2.3)，第2種揺動散逸定理(2.10)に相当するわけだが、Ornstein-Uhlenbeckのブラウン運動は、それを記述するランジュヴァン方程式(2.1)のrandomな部分が、真のブラウン運動であるため、もちろん可微分ではない。しかし(6.13)におけるRは可微分であるため、(6.15),(6.16)から(2.3),(2.10)が導かれるわけではない。しかし我々がのべてきた揺動散逸定理は、遅れのある確率微分方程式(6.7)で記述され、そのrandomな部分が真のブラウン運動であるため、(6.13)とは異なるが、Ornstein-Uhlenbeckのブラウン運動を記述するランジュヴァン方程式(2.1)の拡張になっている。我々の主張は、第1種揺動散逸定理(2.3)，第2種揺動散逸定理(2.10)とは別の、主張(2.8)が、遅れのある確率微分方程式(6.7)に対しても、(6.12)として一般化されることを見、T-正値性をもつ正規定常過程は、ある条件の下で、方程式(6.7)で記述されることを見てきた。その意味で、(6.12)をもって揺動散逸定理ということにした。このとは、Xを記述する方程式(6.7)を得ることと同じことなので、§1でのべた如く、我々の揺動散逸定理はLangevin型のinverse problemといえるわけである。

§7 構成問題

T−正値性をみたす正規定常過程 X に対し、その共分散函数 R を表現する (3.4) の測度 $d\mu$ が、条件 (6.2), (6.6) を満足するとき、X は、三つ組 $[\alpha, \beta, \gamma]$ によって、ランジュヴァン方程式 (6.7) を通して定まった。逆に、どのような状況のもとで、三つ組 $[\alpha, \beta, \gamma]$ から、T−正値性をもつ正規定常過程が構成できるか。この問題に対しては、まだ完全にはわかっていないが、まず、表現核 E に関しては次のことを示すことができる。

定理 正規定常過程 X はスペクトル密度 $\Delta(\xi)$ をもち、Hardy weight、即ち、(6.1) を満足するとする。このとき、Δ の outer function h は存在するので、その Fourier 変換を E とする。

X の共分散函数 R が、条件 (6.2), (6.6) を満足する測度 $d\mu$ によって、(3.4) として表現される為の必要十分条件は、表現核 E が、次の如く表現されることである：

$$(7.1) \qquad E(t) = \int_{(0,\infty)} e^{-t\lambda}\, d\nu(\lambda) \qquad (t>0)$$

ここで、

(7.2) $d\nu$ は、$[0,\infty)$ 上の有界測度，

(7.3) $d\nu(\{0\}) = 0$ ，

(7.4) $\int_0^\infty \lambda\, d\nu(\lambda) < \infty$ ，

(7.5) $\int_0^\infty \lambda^{-1}\, d\nu(\lambda) < \infty$.

<u>注意</u>　正規定常過程Xが T－正値性をもつことは、別のことばでいうと、(3.4)よりわかる如く、<u>共分散函数Rが完全単調(completely monotone)</u>ということであるが、この定理は、<u>標準表現核Eも又 完全単調である</u>ことをいっている。RとEの関係式は、(5-12)である。

さて、はじめの問題であるが、次のことは示せる。

<u>定理</u>　三つ組 $[\alpha,\beta,\gamma]$は、(6.8),(6.9),(6.10)を満足する任意のものとする。このとき、(6.12)の右辺を outer function とする正規定常過程Xは唯ひとつ定まる。

かくして、最後に残った問題は、上の定理で得られたXが T－正値性をもつかどうかであるが、必ずしも一般には成り立たない。$\gamma(ds)=\delta_{\{-1\}}$として反例がある。分っている性質を以下にのべる。$X$のスペクトル密度の outer function をh、その Fourier 変換(標準表現)をEとする。

(7.6)　Eは次の微分積分方程式の一意解である：

$$\begin{cases} E'(t) = -\beta E(t) + \displaystyle\int_{(-\infty,0)} E(t+s)\gamma(ds) & (t>0) \\ E(0+) = \dfrac{\alpha}{\sqrt{2\pi}} & \\ E(t) = 0 & (t<0) \end{cases}$$

(7.7)　$E(t) \geq 0 \quad (t>0)$

(7.8)　$\mathrm{Re}\, h \in L^1(\mathbb{R})$, symmetric, bounded, ≥ 0

$$(7.9)\qquad E(t) = \int_{\mathbb{R}} e^{-it\xi}\,\mathrm{Re}\,h(\xi)\,d\xi \; \left(= (\mathrm{Re}\,h)^{\wedge}(t)\right) \qquad t>0$$

とくに、

$$E \text{ は bdd で、} \quad \lim_{t\to\infty} E(t) = 0$$

$$(7.10)\qquad Z(\zeta) \equiv h(i\zeta) \qquad \mathrm{Re}\,\zeta>0$$

とおくとき、

$$\text{(i)}\qquad Z(\zeta) = \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{\beta - \int_{(-\infty,0)} e^{\zeta s}\,\gamma(ds) + \zeta} \qquad \mathrm{Re}\,\zeta>0$$

$$\text{(ii)}\qquad \int_0^{\infty} e^{-\zeta t} E(t)\,dt = Z(\zeta) \qquad \mathrm{Re}\,\zeta>0$$

$$(7.11)\qquad E \in L^1((0,\infty))$$

以上が分っていることだが、問題は、Eが完全単調となるかどうかで、このための条件は、(7.10)の$Z(\zeta)$が左半平面迄解析接続(有理型とし)され、極が実軸にあり、単純で、正の留数をもつことである、と予想されるが、完全な証明は得ていない。

§8 回路網

§4で、outer function hが有理函数で、その極と零点が負の虚軸上に交互にあらわれた。このような函数は、回路網理論でリアクタンス函数として、重要なものであることを最近知った(すでに、1930年代に一端子対の理論はできていた)。多重マルコフ性をもつものの極限とも考えられる、一般のT-E

値性をもつ正規定常過程に対して、(7.10)で定義した函数 $Z(z)$ は、インピーダンスのもつ性質(正実函数性)をもっており、揺動散逸定理(6.12)、ランジュヴァン方程式(6.9)は、無限回路網の構成と関係があると思う。§4で考えた、多重マルコフ性をもつ場合は、RC一端子対回路のインピーダンスとなっている。§1でのべた、Einsteinの関係、第2揺動散逸定理は、熱雑音に対するNyquistの定理ともよばれており、上にのべた回路網のことはもっと調べる必要を感ずる。

文献

[1] A. Einstein　Ann. Physik, 17 (1905), 549

[2] N. Nyquist　Phys. Rev., 32 (1928), 110

[3] R. Kubo　J. Phys. Soc. Japan, 12 (1957), 507

[4] H. Mori　Progr. Theoret. Phys., 33 (1965), 423

[5] R. Kubo　Reports on Progress in Physics, 29 (1966), 255

[6] R. Kubo　統計物理学(岩波 現代物理学の基礎), 6 (1972)

[7] Y. Okabe　Nagoya Math. J., 54 (1974), 191

[8] Y. Okabe　J. Fac. Sci. Univ. Tokyo, Sec. IA, 26 (1979) (to appear)